

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ АТОМОВ РЗМ НА ИХ КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ.

М.. А. Шумилов, профессор, д. т. н., Г. В. Самохвалов, доцент, к. т. н., ПГТУ

Основную часть редкоземельных металлов (РЗМ) составляют лантаниды. Химические свойства РЗМ являются весьма близкими. Это обусловлено близким строением внешних электронных оболочек их атомов. Самыми внешними электронами у них являются $6s^2$ электроны. Эти внешние электроны при участии $4f$ и $5d$ электронов в основном определяют химические и физические свойства РЗМ.

С ростом номера лантанида в таблице Менделеева от 57 до 71 происходит возрастание количества $m = 4f + 5d$ электронов в атоме, следует ожидать при этом корреляционную взаимосвязь отдельного свойства РЗМ с количеством $4f + 5d$ электронов в атоме.

В настоящей работе провели оценку такой взаимосвязи коэффициента теплопроводности (λ) лантанидов с числом $4f + 5d$ электронов в их атомах. Известно, что основными носителями тепла в металлах являются электроны. Для выполнения этой цели взяли справочные значения λ для всех лантанидов и количество $4f + 5d$ электронов их атомов. Эти массивы данных обсчитали по программе Microsoft Excel. В результате расчета получили уравнения первого, второго, третьего порядка и соответствующие им R^2 . Величины R^2 характеризует тесноту связи между исследуемыми характеристиками. Во всех случаях R^2 оказались достаточно высокими. Они возрастали с увеличением порядка уравнений и равнялись 0,57; 0,72; 0,83. λ иттербия примерно в 3 раза выше, чем у других РЗМ. Поэтому провели расчеты, выбросив его из массива. Это привело к возрастанию R^2 . В этом случае значение R^2 оказалось для уравнений всех трех порядков 0,97 – 0,98. В качестве примера приводим одно из рассчитанных уравнений.

$$\lambda = 9 \cdot 10^{-7} \cdot m^2 + 7 \cdot 10^{-4} \cdot m + 0,0997.$$

Такие расчеты выполнили и для массива $\lambda - r_m$. Здесь r_m – металлический радиус атомов лантанидов. В массиве были включены все лантаниды, кроме иттербия и прометея. В справочнике для прометея нет численного значения r_m . Значения R^2 для уравнения первого, второго, третьего порядка оказались 0,011; 0,14; 0,38 соответственно.

Сравнивая значения R^2 для взаимосвязей $\lambda - m$ и $\lambda - r_m$, видим, что в первом случае они значительно выше.

На основании изложенного выше можно сделать вывод, что установлена корреляционная взаимосвязь λ с m и r_m . Теснота взаимосвязи с λ РЗМ с электронным строением их атомов значительно выше, чем с их размерами.